Resultados principales producto tensorial.

Tenemos dos sistemas:

Si el edo. del sistema 1, $|\psi\rangle \in \mathcal{E}_1$

" " " 2, $|\varphi\rangle \in \mathcal{E}_2$

Base $\mathcal{E}_1$ $\{|v_i\rangle : i=1,\dots,N_1\}$

Base $\mathcal{E}_2$ $\{|u_j\rangle : j=1,\dots,N_2\}$

El edo. del sistema conjunto se representa en la base $\{|v_i\rangle \otimes |u_j\rangle : i=1,\dots,N_1 ; j=1,\dots,N_2\}$

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$$

Operadores

$$A : \mathcal{E}_1 \to \mathcal{E}_1 \qquad \tilde{A} : \mathcal{E} \to \mathcal{E}$$

$$\tilde{A} = A \otimes \mathbb{1}_2$$

$$B : \mathcal{E}_2 \to \mathcal{E}_2 \qquad \tilde{B} : \mathcal{E} \to \mathcal{E}$$

$$A \otimes B : \mathcal{E} \to \mathcal{E} \qquad [\tilde{A}, \tilde{B}] = 0$$

Operadores de distinto espacio conmutan

Ejemplo: # de partícula

$$[P_x^{(1)}, X^{(2)}] = 0$$

Notación: $\tilde{A} = A$, $\tilde{B} = B$

$$|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle = |\psi\rangle |\varphi\rangle = |\psi\,\varphi\rangle$$

- Producto tensorial y C.C.O.C.

Si $\{A_1, \ldots, A_n\}$ es un C.C.O.C en $\mathcal{E}_1$

y $\{B_1, \ldots, B_m\}$ es un C.C.O.C. en $\mathcal{E}_2$

$\{A_1, \ldots, A_n\} \cup \{B_1, \ldots, B_m\}$ es un C.C.O.C. en $\mathcal{E}$

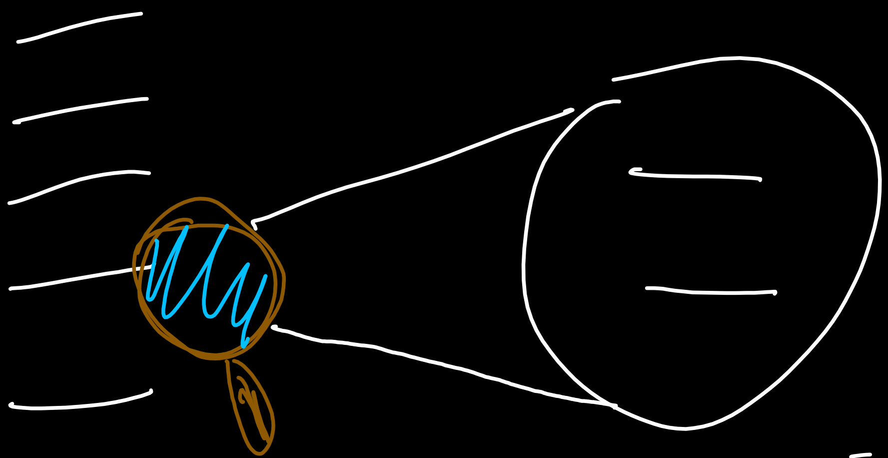
Espín del electrón

- Hemos hasta ahora considerado al electrón como:
  - Partícula puntual, masa m_e
  - Tiene 3 grados de libertad (x, y, z)
  - Estado (en repr. $\{|\vec{r}\rangle\}$) $\psi(\vec{r})$
  - Usando esto $\rightarrow$ espectro de H

$$E_n = -\frac{E_0}{n^2} \quad \text{(no relativista)}$$

- Mayor precisión al incorporar efectos relativistas.
- Ecuación de Dirac $\Rightarrow$ espín
- Espín se descubrió experimentalmente
- Teoría de Pauli describe espín no relativista (límite $v/c \ll 1$ de Dirac)

- Evidencia experimental del espín
  - Estructura fina de los átomos:



interacción espín-órbita

en el M.R. del e^-, el mov del núcleo produce un $\vec{B}$.

El espín del e^- tiene un momento magnético que interactúa con $\vec{B}$.

  - Efecto Zeeman

Los niveles de energía de un átomo se mueven al someterlo a un campo magnético.

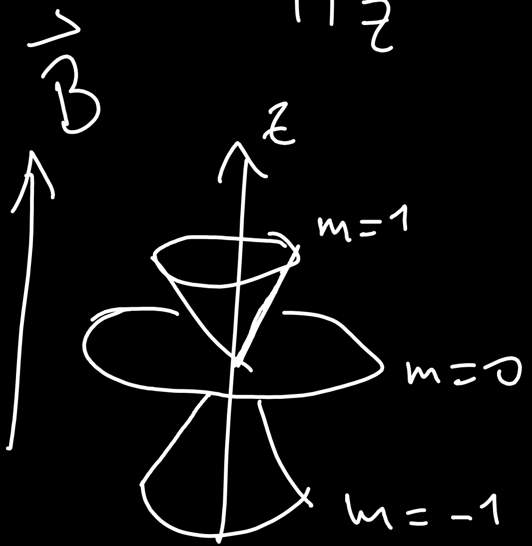
(momento magnético orbital) $\vec{\mu}_L = \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L}$ $\quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$

magnetón de Bohr

Agregar al Hamiltoniano

$$H_z = -\vec{\mu}_L \cdot \vec{B} = -\frac{\mu_B}{\hbar} B_0 L_z$$

$\vec{B} = B_0 \hat{e}_z$



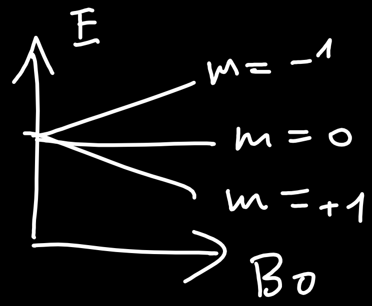
L^2, L_z

$\downarrow$

Eigenvectores $|l, m_l\rangle$

eigenvalores $-\mu_B B_0 m_l$

$\therefore$ Los niveles de energía se dividen según m_l.



¿En cuántos niveles se divide un estado con número cuántico de magnitud de momento angular l?

$2l+1$ porque $m_l = -l, \ldots, l$

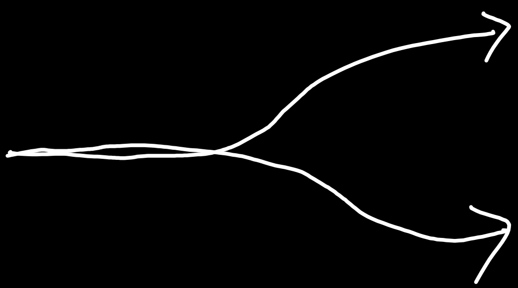
Como l es entero se divide en un número impar de estados.

- Efecto Zeeman anómalo

número atómico

Hay ciertos átomos (con Z impar) que se dividen en un # par de niveles. (evidencia de momento angular semi-enteros)

- Experimento de Ster-Gerlach



se divide en 2

Para momento angular orbital debería ser impar!

- Habíamos encontrado que l debe ser entero para satisfacer

$$\psi(r,\theta,\varphi)=\psi(r,\theta,\varphi+2\pi)$$

- ¿De dónde sale espín semi-entero para explicar experimentos?

- Descripción cuántica de partículas con espín: teoría de Pauli

$$|x,y,z\rangle \otimes |s, m_s\rangle$$

$j = \frac{1}{2}$, $m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$

i) Existe un observable $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$ de espín que es un momento angular:

$$[S_i, S_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k.$$

ii) Los operadores de espin actúan en un nuevo espacio $\mathcal{E}_s$. $\{S^2, S_z\}$ son un C.C.O.C. en $\mathcal{E}_s$.

i.e. $\mathcal{E}_s$ es generado por los e.v. de S^2, S_z

$$|s, m_s\rangle$$

iii) El estado completo del sistema

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\vec{r}} \otimes \mathcal{E}_s$$

posición espín.

$\therefore$ Observables de espín conmutan con observables de posición.

iv) El electron tiene $S=\frac{1}{2}$ y su momento magnético es

$$\vec{\mu}_s = \frac{2\mu_B}{\hbar}\vec{S}$$

g_e = factor g de Landé

Según Dirac $g_e = 2$

Según electrodinámica cuántica $g_e = 2.00231930436172(5)$

Forma de calificar:

70% tareas (Pueden entregar tareas anteriores)

(3 o 4) 30% exámenes cortos

100% final examen

$$\# \text{reposiciones} = \text{floor}\left(\frac{\# \text{exámenes}}{2}\right)$$

- No tiene análogo clásico

- Base de $\mathcal{E}_s$

$$\left\{ |s=\tfrac{1}{2}, m_s=\tfrac{1}{2}\rangle = |+\rangle,\ |s=\tfrac{1}{2}, m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle = |-\rangle \right\}$$

$$S^2|\pm\rangle = \hbar^2 s(s+1)\,|\pm\rangle$$
$$= \frac{3}{4}\hbar^2\,|\pm\rangle$$

$$S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\,\mathbb{1}_s \quad \left(\text{en este espacio}\right)$$

$$S_z|\pm\rangle = \pm\hbar\,|\pm\rangle$$

Estado general de espín

$$|\chi\rangle = C_+|+\rangle + C_-|-\rangle$$

$$S_+|+\rangle = 0 \qquad S_-|+\rangle = \square\,|-\rangle$$

$$S_+|-\rangle = \square\,|+\rangle \qquad S_-|-\rangle = 0$$

$$J_\pm|jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}\,|j\,m\pm1\rangle$$

$j=\frac{1}{2}$ $\quad m=\pm\frac{1}{2}$

$$\vec{S} = (S_x, S_y, S_z) = \frac{\hbar}{2}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$$

Matrices de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\langle s' m_s' | \underbrace{S_z}_{\hbar/2} | s\, m_s \rangle = 2 m_s \delta_{ss'} \delta_{m_s m_s'}$$

$$S_x = \frac{S_+ - S_-}{2}$$

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$$

- Juntemos los grados de libertad externos (orbitales) e internos (espín)

En $\mathcal{E}_{\vec{r}}$ $\{X, Y, Z\}$ es un CCOC pero en $\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\vec{r}} \otimes \mathcal{E}_s$ ya no es un CCOC.

- CCOC en $\mathcal{E}$: $\{\underbrace{X, Y, Z}_{\text{CCOC en } \mathcal{E}_{\vec r}}, \underbrace{S^2, S_z}_{\text{CCOC en } \mathcal{E}_s}\}$

usando estos

$\{P_x, P_y, P_z, S^2, S_z\}$

$\{P_x, Y, P_z, S^2, S_x\}$

$\{\underbrace{H, L^2, L_z}_{|n\, l\, m\rangle}, \underbrace{S^2, S_x}_{|s\, m_s\rangle}\}$

En este espacio kets $|\vec r\rangle \otimes |\epsilon\rangle$

con $\epsilon = +, -$

Por definición $|\vec r\, \epsilon\rangle$ es e.V. de

$$X, Y, Z, S^2, S_z$$

$$X|\vec r\, \epsilon\rangle = x|\vec r\, \epsilon\rangle$$

$$S^2|\vec r\, \epsilon\rangle = \frac{3\hbar^2}{4}|\vec r, \epsilon\rangle$$

Relación de completitud

$$\sum_{\epsilon} \int d^3r\, |\vec r\, \epsilon\rangle\langle \vec r\, \epsilon| = \int d^3r \left(|\vec r +\rangle\langle \vec r +| + |\vec r -\rangle\langle \vec r -|\right) = \mathbb{1}_{\vec r s}$$

$$|\psi\rangle = \sum_{\epsilon} \int d^3r \, |\vec{r}\,\epsilon\rangle\langle\vec{r}\,\epsilon|\psi\rangle$$

funciones de onda

$$\langle\vec{r}\,\epsilon|\psi\rangle = \psi_{\epsilon}(\vec{r})$$

necesitamos especificar $\psi_+(\vec{r})$, y $\psi_-(\vec{r})$ para definir el estado.

Representación de "espinores"

$$[\psi](\vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

vector de funciones de onda

Recuerden:

no siempre $|\psi\rangle = |\varphi\rangle \otimes |\chi\rangle$

$$\underset{\uparrow \atop \mathcal{E}_{\vec{r}}}{|\varphi\rangle} \qquad \underset{\uparrow \atop \mathcal{E}_s}{|\chi\rangle}$$

Pero si sí se factoriza

$$[\psi](\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix}$$

- Operadores orbitales (en $\mathcal{E}_{\vec{r}}$)

$$|\psi'\rangle = X|\psi\rangle$$

$$\psi'_\epsilon(\vec{r}) = \langle\vec{r}\epsilon|X|\psi\rangle = x\,\psi_\epsilon(\vec{r})$$

no depende de ϵ

$$[\![X]\!] = \begin{pmatrix} X & 0 \\ 0 & X \end{pmatrix} = X \otimes \mathbb{1}_s$$

$$[\![X]\!][\psi](\vec{r}) = \begin{pmatrix} X & 0 \\ 0 & X \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} x\,\psi_+(\vec{r}) \\ x\,\psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

- Operadores de espín

$$S_z = \mathbb{1}_{\vec{r}} \otimes S_z$$

$$[\![S_z]\!] = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$[\![S_z]\!][\psi](\vec{r}) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} +\psi_+(\vec{r}) \\ -\psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

Operadores Mezclados

$$\overline{L_z S_z} = L_z \otimes S_z$$

$$[\![L_z S_z]\!][\psi](\vec{r}) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

$$\underset{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}}{\uparrow}$$

$$\overline{\vec{S}\cdot\vec{P}} = \frac{\hbar}{2}\left(\sigma_x P_x + \sigma_y P_y + \sigma_z P_z\right)$$

Hamiltoniano de un electrón con espín en un campo magnético

Potencial vectorial

$$H = \underbrace{\frac{1}{2m}\left[\vec{P} - q\vec{A}(\vec{R},t)\right]^2 + qU(\vec{R},t)}$$

potencial escalar

$$+ \underbrace{\frac{q\hbar}{2m}\vec{\sigma}\cdot\vec{B}(\vec{R},t)}_{-\vec{\mu}_s\cdot\vec{B}}.$$

matriz de Pauli

Campo magnético